

PATENT ABSTRACTS OF JAPAN

(11)Publication number : 05-164751

(43)Date of publication of application : 29.06.1993

(51)Int.Cl. G01N 30/72
G01N 27/62
G01N 30/86

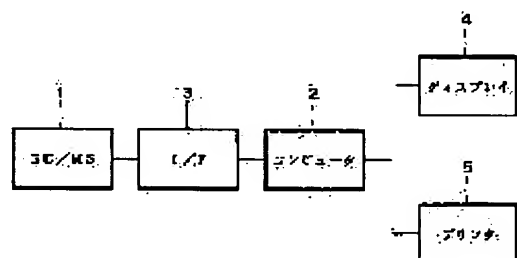
(21)Application number : 03-336753 (71)Applicant : SHIMADZU CORP
(22)Date of filing : 19.12.1991 (72)Inventor : NAKAGAWA KATSUHIRO

(54) DATA PROCESSOR FOR CHROMATOGRAPH/MASS SPECTROMETER

(57)Abstract:

PURPOSE: To reduce the data analyzing time and improve accuracy of the title data processor by storing the mass numbers of mass spectra of a compound according to their ranks and calling the mass spectra at each peak, and then, displaying the mass chromatogram of the mass number peculiar to each peak after automatically selecting the mass number.

CONSTITUTION: A computer 2 detects all peaks from measured total ion chromatograms and stores the scan numbers of the starting point, peak top, and peak ending point of each peak. Then the computer 2 calls the mass spectrum of each detected peak from a storage device. In this case, it is contrived that each mass spectrum from which a peak top averaging back land is erased can be arbitrarily selected. Moreover, the computer 2 finds the degree of importance of each mass number from all mass numbers of each mass spectrum and selects the mass numbers having low frequencies of occurrence as peculiar mass numbers at every peak. Then the computer 2 prepares mass chromatograms on the selected mass numbers and displays the prepared mass chromatogram on a display.



LEGAL STATUS

[Date of request for examination] 21.10.1993

[Date of sending the examiner's decision
of rejection]

[Kind of final disposal of application]

other than the examiner's decision of rejection or application converted registration]

[Date of final disposal for application]

[Patent number] 2100311

[Date of registration] 22.10.1996

[Number of appeal against examiner's decision of rejection]

[Date of requesting appeal against examiner's decision of rejection]

[Date of extinction of right]

Copyright (C); 1998,2003 Japan Patent Office

(19)日本国特許庁 (J P)

(12) 公 開 特 許 公 報 (A)

(11)特許出願公開番号

特開平5-164751

(43)公開日 平成 5 年(1993) 6 月29日

(51)Int.Cl. ⁵	識別記号	庁内整理番号	F I	技術表示箇所
G 0 1 N 30/72	A	8506-2 J		
27/62	D	7414-2 J		
30/86	M	8506-2 J		

審査請求 未請求 請求項の数 1 (全 4 頁)

(21)出願番号 特願平3-336753

(22)出願日 平成 3 年(1991)12月19日

(71)出願人 000001993

株式会社島津製作所

京都府京都市中京区西ノ京桑原町 1 番地

(72)発明者 中川 勝博

京都市中京区西ノ京桑原町 1 番地 株式会
社島津製作所三条工場内

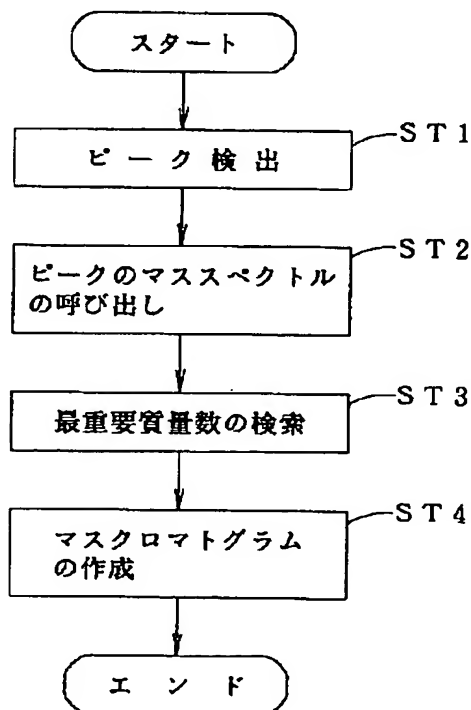
(74)代理人 弁理士 中村 茂信

(54)【発明の名称】 クロマトグラフ／質量分析計用データ処理装置

(57)【要約】

【目的】 各ピークに「特有の質量数」を自動的に選出して、その質量数についてのマスキロマトグラムを表示するクロマトグラフ／質量分析計用データ処理装置を提供する。

【構成】 マススペクトルデータベース中での出現頻度の低い順に、各質量数を順位付けして、この順位を記憶する記憶手段を備え、クロマトグラム上の各ピークについて、当該ピークのマススペクトルを呼び出す呼び出し処理 (S T 1、S T 2) と、呼び出されたマススペクトルについて、そのスペクトルを構成している各質量数を前記記憶手段のデータと照合して、前記出現頻度順位に基づいて当該ピークに特有の質量数を決定する質量数決定処理 (S T 3) と、決定された質量数について、マスキロマトグラムを表示する表示処理 (S T 4) とで構成される。



【特許請求の範囲】

【請求項 1】 化合物のマススペクトルを多数種類登録しているデータベースを検索して、出現頻度の低い質量数の順に各質量数を順位付けして、その順位を各質量数に対応させて記憶しておく質量数データベース作成手段と、

クロマトグラム上の各ピークについて、当該ピークのマススペクトルを呼び出す呼び出し手段と、

呼び出されたマススペクトルについて、そのスペクトルを構成している各質量数を前記質量数データベースと照合して、前記出現頻度順位に基づいて当該ピークに特有の質量数を決定する特有質量数決定手段と、

決定された特有の質量数について、マスキロマトグラムを表示するマスキロマトグラム作成手段とを備えることを特徴とするクロマトグラフ／質量分析計用データ処理装置。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【産業上の利用分野】 この発明は、クロマトグラフ／質量分析計を利用している工業、薬品、医療などの分野に関する。

【0002】

【従来の技術】 例えば、ガスクロマトグラフ／質量分析計で未知試料を分析する場合、出現したクロマトグラム上の各ピークがどのような化合物であるかを同定したり、ピークが単一成分によるものか複数成分が混在した不分離ピークなのかを判別したい場合がある。かかる場合、当該ピークに固有な質量数をマススペクトル上で選び出して、質量数別のクロマトグラム（以下、マスキロマトグラム（MC）という）と、もとのクロマトグラム（以下、トータルイオンクロマトグラム（TIC）という）とを一緒に画面表示またはプリントアウトして比較・解析を行なっている。

【0003】

【発明が解決しようとする課題】 上記した目的の為にマスキロマトグラムを表示させる場合、各ピークに「特有の質量数」（つまり、他のピークのマススペクトルには出現しないような質量数）について、マスキロマトグラムを描かせることが重要である。しかし、従来の装置では、各ピークに「特有の質量数」を自動的に選び出す手段がなく、従って、専ら、オペレータの知識と経験に基づいて各ピーク毎に「特有と思われる質量数」を選び出して、マスキロマトグラムを描かせており、「特有の質量数」の選択に客観性がなく、かつ手順の実行に長時間を要するという問題点があった。

【0004】 この発明は、この問題点に着目してなされたものであって、各ピークに「特有と思われる質量数」を自動的に選出して、その質量数についてのマスキロマトグラムを表示させるクロマトグラフ／質量分析計用データ処理装置を提供することを目的とする。

【0005】

【課題を解決するための手段】 上記の目的を達成する為、この発明に係るクロマトグラフ／質量分析計用データ処理装置は、①化合物のマススペクトルを多数種類登録しているデータベースを検索して、出現頻度の低い質量数の順に各質量数を順位付けして、その順位を各質量数に対応させて記憶しておく質量数データベース作成手段と、②クロマトグラム上の各ピークについて、当該ピークのマススペクトルを呼び出す呼び出し手段と、③呼び出されたマススペクトルについて、そのスペクトルを構成している各質量数を前記質量数データベースと照合して、前記出現頻度順位に基づいて当該ピークに特有の質量数を決定する特有質量数決定手段と、④決定された特有の質量数について、マスキロマトグラムを表示するマスキロマトグラム作成手段とを特徴的に備えている。

【0006】

【作用】

①質量数データベース作成手段は、化合物のマススペクトルを多数種類登録しているマススペクトルデータベースを検索して、そのデータベース中で出現頻度の低い質量数の順に各質量数を順位付けする。そして、その出現頻度順位を、各質量数に対応させて質量数データベースに記憶する。

【0007】 なお、出現頻度が低い質量数ほど、クロマトグラムのピークを同定などをする場合に有効である。また、この質量数データベースの作成は、クロマトグラフ／質量分析計用データ処理装置を動作させる以前に行われ、クロマトグラフ／質量分析計用データ処理装置の動作中、必要に応じて、この質量数データベースが参照される。

【0008】 ②呼び出し手段は、クロマトグラフ／質量分析計用データ処理装置の動作が開始されマススペクトルデータが得られた後に作用して、クロマトグラムの各ピークについて、当該ピークのマススペクトルを呼び出す。

③特有質量数決定手段は、呼び出されたマススペクトルについて、そのスペクトルを構成している各質量数を、前記質量数データベースのデータと照合して、質量数データベースに記憶されている質量数の出現頻度の順位に基づいて、当該ピークに特有の質量数を決定する。つまり、「各ピークに特有の質量数」の選択は自動的に行われ、かつ選択法には客観性がある。

【0009】 ④マスキロマトグラム作成手段は、特有質量数決定手段によって決定された特有の質量数について、マスキロマトグラムを表示する。

【0010】

【実施例】 以下、実施例に基づいて、この発明を更に詳細に説明する。図 1 は、この発明の一実施例であるクロマトグラフ／質量分析計用データ処理装置のブロック図を図示したものである。この装置は、ガスクロマトグラ

フ質量分析計（GC/MS）1と、このガスクロマトグラフ質量分析計1よりのデータに基づいて未知試料の分析処理等を行うコンピュータ2と、ガスクロマトグラフ質量分析計1とコンピュータ2とを接続するインタフェース（I/F）3と、クロマトグラムなどを表示するディスプレイ4、プリンタ5とで構成されている。

【0011】コンピュータ2には、図示しない記憶装置が設けられており、予め、質量数データベースが作成されている。質量数データベースとは、図3に例示するように、質量数（質量数1～質量数n）毎に、その重要度をワードデータとして記憶したものをいう。ここで、重要度とは、クロマトグラムの各ピークを同定などする場合の有効性を表す順位をいい、例えば、市販のマススペクトルデータベース（例えば、米国NIST発行のもの）中を検索して、各質量数の出現頻度を求め、その頻度の少ない順に順位付けしたものをいう。尚、独自に作成したオリジナルのマススペクトルデータベースを基にして、上記と同じ方法で質量数データベースを作成してもよい。

【0012】図2は、上記の構成からなるクロマトグラフ/質量分析計用データ処理装置の動作手順を示すフローチャートである。以下、図2を参照しつつ説明する。コンピュータ2は、測定されたトータルイオンクロマトグラムより、全てのピークを検出して、各ピークの開始点、ピークトップ、ピーク終了点のスクランナンバーを記憶する（ステップST（以下、STと略す）1）。

【0013】次に、コンピュータ2は、ST1の処理で検出された各ピークのマススペクトルを記憶装置（図示しない）より呼び出す（ST2）。ここで、マススペクトルとして、①ピークトップのマススペクトル、②ピーク開始点から終了点までの全てのマススペクトルを平均化したマススペクトル、あるいは、③これらのマススペクトルからピーク開始点のマススペクトルを差し引いてバックグラウンド消去をしたマススペクトル、が任意に選

択できるようにしておく。

【0014】ST2の処理によって、各ピークについてのマススペクトルが呼び出されたら、その各マススペクトルに現れて予め定められた値以上の相対強度をもつ全ての質量数について、前記質量数データベースを検索して、各質量数の重要度を求め、最も重要度の高い（つまり、出現頻度の低い）質量数を各ピーク毎に「特有の質量数」として選択する（ST3）。尚、この「特有の質量数」は複数個選択してもよい。

【0015】続いて、コンピュータ2は、ST3の処理で選択された質量数について、マスキロマトグラムを作成して、ディスプレイ4等に表示する（ST4）。

【0016】

【発明の効果】以上説明したように、この発明に係るクロマトグラフ/質量分析計用データ処理装置は、予め各質量数の重要性を求め、これを質量数データベースに記憶しておくことによって、マスキロマトグラム作成時には自動的に「各ピークに特有の質量数」を決定している。つまり、マスキロマトグラム作成時の質量数が高速で自動的に決定され、しかも、常に同じ判断基準で決定されるので、データ解析の時間短縮と高精度化を実現することができる。

【図面の簡単な説明】

【図1】この発明の一実施例であるクロマトグラフ/質量分析計用データ処理装置のブロック図である。

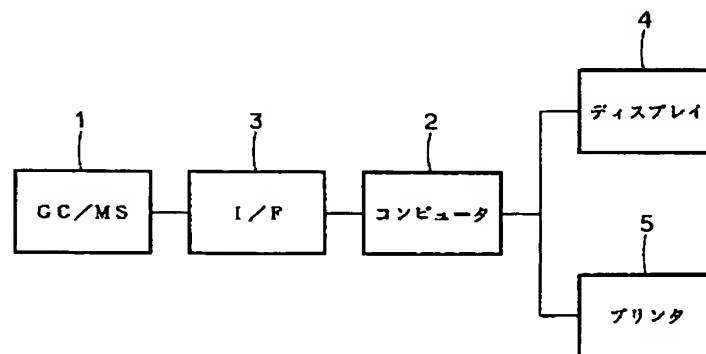
【図2】図1の装置の動作を説明する為のフローチャートである。

【図3】質量数データベースのデータ構造を図示したものである。

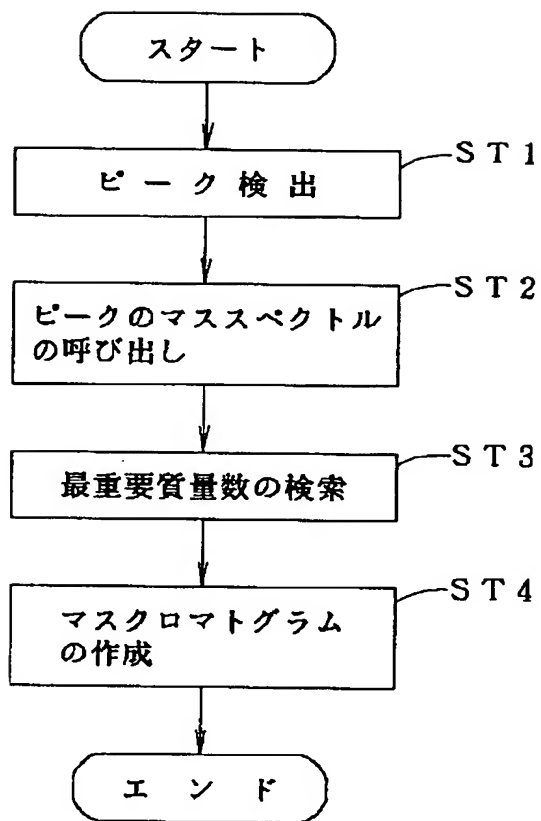
【符号の説明】

ST2	呼び出し手段
ST3	特有質量数決定手段
ST4	マスキロマトグラム作成手段

【図1】



【図 2】



【図 3】

質量数 1 の重要度	1 ワード目
質量数 2 の重要度	2 ワード目
質量数 n の重要度	n ワード目